

Интерпретация спектров КР кристаллов CuCl_2

Комлева Евгения Викторовна

Николаев Сергей Алексеевич, Цирлин Александр Александрович, Мазуренко Владимир Гаврилович

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

Мазуренко Владимир Гаврилович, д.ф.-м.н.

kewi999@mail.ru

При нормальных условиях в кристаллах CuCl_2 существует намагничённость, обусловленная присутствием двухвалентной меди Cu^{2+} . Несмотря на то, что кристаллическая структура соединения является неполярной, эксперименты показывают наличие при температурах ниже температуры Нееля $T_N=23,9$ К также спонтанной электрической поляризации. Это означает, что в кристаллах одновременно существуют электрический и магнитный порядок.

Появление спонтанной электрической поляризации может быть обусловлено присутствием искажений кристаллической решетки в магнитоупорядоченном состоянии. Рассмотрение динамики решётки позволяет обнаружить такие искажения. Актуальную информацию о динамике решетки кристаллов можно получить путем измерения спектров комбинационного рассеяния (КР) и вычислений колебаний атомов на основе первопринципных расчетов электронной структуры.

Целью данной работы был первопринципный расчёт частот колебаний атомов кристалла CuCl_2 в центре зоны Бриллюэна (Γ -точке) и интерпретация экспериментальных данных по спектрам КР.

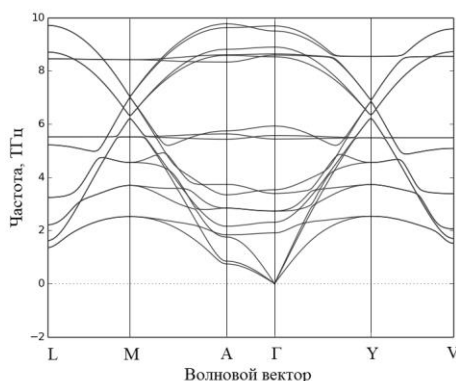


рис. 2 – Дисперсионные кривые для кристалла дихлорида меди (группа симметрии $C2/m$)

При комнатной температуре дихлорид меди имеет моноклинную кристаллическую структуру с группой симметрии $C2/m$. Для данного состояния были проведены расчёты динамики решётки и получены дисперсионные кривые (рис.1). Определены расчётные частоты колебаний атомов в Γ -точке. Согласно теоретико-групповому анализу, в спектрах комбинационного рассеяния кристаллов дихлорида меди активны колебания симметрии A_g и B_g .

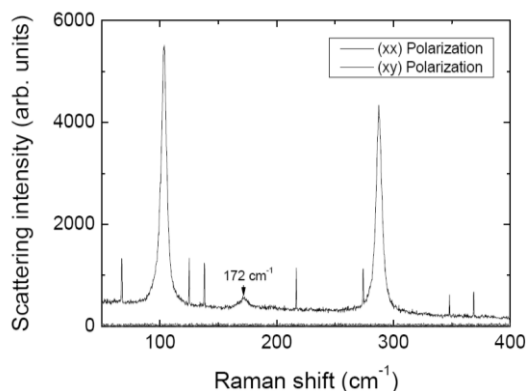


рис. 3 – Экспериментальный КР спектр кристалла CuCl_2
Представлен группой Peter'a Lemmens'a (TU Braunschweig).

В эксперименте (рис.2) наблюдаются резкие пики с соответствующими им частотами $\nu \sim 3,2$ ТГц и $\nu \sim 8,9$ ТГц и размытый широкий максимум с частотой $\nu \sim 5,2$ ТГц. Узкие невысокие пики рассматриваются нами как фоновый сигнал. Наблюдается хорошее согласие рассчитанных значений частот с экспериментальными.